

*Departamento de Engenharia Elétrica (DEL), Centro de Ciências Exatas e Tecnologia (CCET)
Universidade Federal de Sergipe (UFS), Cidade Universitária "Prof. José Aloísio de Campos" - Av. Marechal
Rondon, s/n Jardim Rosa Elze São Cristóvão-SE, Brasil, CEP 49100-000, Tel.: +55 79 2105-6835*

E-mails: rodrigorbst@gmail.com, cvcardoso@ufs.br, ahidalgo@ufs.br

Abstract— This paper describes the development of an intelligent system of odours identification, whose main features are the portability and the versatility, being of easy handling and transportation, and, with few changes, applicable to several substances. The objective of this research is to turn this system a tool of answer fast when compared with laboratory techniques usually used in the characterization of gaseous compositions. This system is composed by no selective gas sensors and artificial neural network that can to recognize substances through its volatile compounds.

Keywords— gas sensors, electronic nose, neural networks, recognition of smell, odours.

Resumo— Neste trabalho é descrito o desenvolvimento de um sistema inteligente de identificação de odores cujas características principais são a portabilidade e a versatilidade, sendo de fácil manuseio e transporte, e, através de poucas mudanças, aplicável a diversas substâncias. O objetivo deste trabalho é tornar o sistema uma ferramenta de resposta rápida quando comparada com as técnicas laboratoriais normalmente utilizadas na caracterização de compostos gasosos. Este sistema consiste de sensores de gás não seletivos que associados a redes neurais artificiais tem a capacidade de realizar o reconhecimento de substâncias por meio dos seus compostos voláteis.

Palavras-chave— sensores de gás, nariz eletrônico, redes neurais artificiais, reconhecimento de aromas, odores.

1 Introdução

Nas últimas décadas, tem-se observado grande interesse na análise de gases com uma preocupação cada vez maior em relação à proteção do ambiente, estado de conservação e qualidade dos alimentos, detecção de microorganismos contaminantes e patogênicos, otimização de técnicas de diagnóstico médico, qualidade de combustíveis, entre outras aplicações (RÖCK, 2008; WILSON, 2009).

Existe uma necessidade crescente por sistemas compactos para análise de gases, uma vez que as técnicas analíticas tradicionais como a cromatografia gasosa e a espectrometria de massa, apesar de serem precisas, são onerosas, possuindo ainda resposta significativamente longa e raramente são utilizadas em campo ou aplicações em tempo real (LOZANO, 2004). Como consequência disto, uma área promissora é a dos chamados narizes eletrônicos, pois estes podem ser concebidos com um baixo custo, pequena dimensão, fácil manuseio e com tempo de resposta curto em comparação com as técnicas analíticas tradicionais (STRIKE, 1999; RÖCK, 2008), sendo utilizados como técnica de análise alternativa ou como análise inicial daquelas técnicas.

Um nariz eletrônico é um sistema composto por uma matriz de sensores de gás em conjunto com técnicas de reconhecimento de padrões (PERSAUD, 1982). A principal característica deste sistema é que cada sensor do arranjo possui um perfil de sensibilidade diferente para cada composto gasoso analisado. Assim, resulta-se em distintos padrões de resposta para diferentes odores.

O odor de uma substância pode ser explicado pela ocorrência de compostos químicos cuja principal característica é a volatilidade, a qual permite que tais componentes sejam percebidos pelos receptores nasais (NYKANEN, 1991). Em bebidas alcoólicas, por exemplo, o componente volátil majoritário é o álcool etílico, ao lado do qual estão presentes outros compostos voláteis, tais como ésteres, aldeídos, alcoóis superiores (propílico, butílico e amílico), cetonas e hidrocarbonetos.

O campo de narizes eletrônicos tem-se desenvolvido rapidamente nos últimos anos, visto que estes instrumentos possibilitam a realização de medidas diretas com poucos aprimoramentos e com relativa facilidade de desenvolvimento (RÖCK, 2008). Estas características levaram ao crescimento do interesse tanto no meio acadêmico como na indústria. Os narizes eletrônicos são frequentemente apresentados como instrumentos para fazer rápidas medições no campo, mas a maioria da literatura trata-os como instrumentos de bancada laboratoriais, fazendo medições em condições controladas (WILSON, 2009).

No presente trabalho foram utilizados sensores de gás de óxido de estanho em conjunto com redes neurais artificiais para o desenvolvimento de um sistema de sensoriamento de gases, habitualmente conhecido como nariz eletrônico, capaz de analisar e identificar amostras a partir do respectivo odor e aplicado no reconhecimento de três diferentes bebidas alcoólicas (um aguardente de cana e dois tipos de vinhos tinto) para validação funcional. Uma das principais características deste sistema é a portabilidade, sendo possível realizar medições em campo com fácil transporte e operação.

2 Sensores

O conjunto de sensores de gás é a parte crítica de um nariz eletrônico, por isso, em geral, é desejável que os sensores possuam características como ampla seletividade e alta sensibilidade, bem como uma resposta rápida (STETTER, 2002). Por outro lado, na conjuntura de um sistema portátil e com eletrônica embarcada são desejáveis requisitos como pequena dimensão e baixo consumo de energia.

Apesar de uma única tecnologia ainda não preencher todos os requisitos aplicáveis, uma variedade de sensores de gás tem sido utilizado em narizes eletrônicos, destacando-se os sensores de óxido metálico (MOS) e os polímeros condutores orgânicos (RÖCK, 2008, WILSON, 2009).

Os sensores de gás do tipo semicondutor de óxido metálico são, possivelmente, os mais utilizados em aplicações com narizes eletrônicos, pois apresentam elevado nível de sensibilidade a diversos tipos de gases, oferecem ainda bom equilíbrio de sensibilidade durante o tempo de vida e estão disponíveis comercialmente em uma ampla variedade com diferentes seletividades (BARSAN, 2007). A tecnologia do tipo MOS inclui sensores de óxido de estanho, titânio, tungstênio e irídio, dopado com um metal nobre catalisador tais como a platina ou paládio. O mais conhecido é o sensor fabricado com óxido de estanho (SnO_2).

O princípio de funcionamento dos sensores de óxido de estanho baseia-se na mudança de condutividade elétrica da região ativa do dispositivo, provocada pela interação de sua estrutura química com moléculas gasosas do ambiente (DEMARNE, 1992; STETTER, 2002). O principal motivo pelo interesse neste material é devido à capacidade de estabelecer, em altas temperaturas, reações reversíveis de oxidação com moléculas em suspensão gasosa diretamente ou por meio de agentes catalíticos (FÍGARO, 2005). Essas reações sempre envolvem a adsorção de íons negativos, na forma molecular ou atômica, do oxigênio e/ou de compostos hidróxidos.

Na ausência de gases redutores, o oxigênio captura elétrons livres por eletro-afinidade, em seguida é adsorvido sobre a superfície do SnO_2 formando uma barreira de potencial (E) nas fronteiras dos grãos, a qual restringe o fluxo de elétrons causando o aumento da resistência elétrica do sensor, conforme esquematizado na figura 1(a). Quando o sensor é exposto a uma atmosfera contendo gases redutores, a superfície do óxido de estanho adsorve estas moléculas de gases causando oxidação, com isso ocorre à diminuição da barreira de potencial permitindo o fluxo de elétrons mais facilmente, reduzindo desse modo a resistência elétrica, conforme ilustrado na figura 1(b).

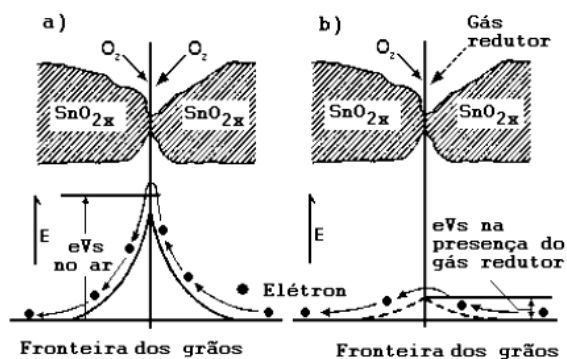


Figura 1 – Relação entre o gás redutor e o oxigênio absorvido na superfície de SnO_2 : (a) aumento da barreira de potencial (E) da região ativa do sensor (b) diminuição da barreira de potencial (E) da região ativa do sensor (FÍGARO, 2005).

Em aplicações práticas os sensores de óxido de estanho tipo *Tagushi*, da empresa japonesa *Figaro Inc.*, são os mais utilizados, pois possuem alto nível de sensibilidade para diversos tipos de gases e estão disponíveis comercialmente em uma ampla variedade de tipos com diferentes seletividades.

A relação entre a resistência do sensor (R_s) do sensor *Tagushi* e a concentração de gases é expressa pela equação 1 sob certa variação da concentração do gás.

$$R_s = A * [C]^{-\alpha} \quad (1)$$

Onde:

R_s – resistência elétrica do sensor;

A – constante;

$[C]$ – concentração do gás;

α – inclinação da curva de R_s .

De acordo com a equação 1, a relação entre a resistência do sensor e a concentração do gás é linear para uma escala logarítmica, isto dentro de um intervalo de valores para esta concentração. Na figura 2 é indicado um exemplo típico da relação entre a resistência do sensor e a concentração dos gases.

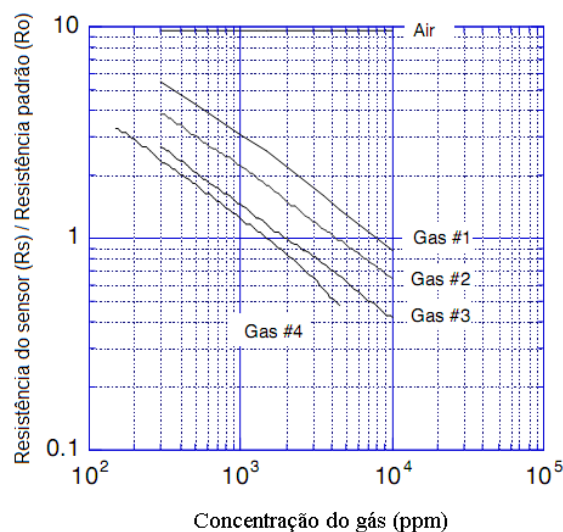


Figura 2 – Característica típica de sensibilidade dos sensores TGS [FÍGARO, 2005].

3 Redes Neurais Artificiais

As redes neurais artificiais (*Artificial Neural Networks* – ANNs) são sistemas de processamento fundamentados nas redes neurais biológicas, podendo ser implementadas em hardware ou software e capazes de lidar com problemas abstratos ou pouco definidos (HAYKIN, 2001). As redes neurais possuem características intrínsecas tais como adaptabilidade, tolerância a falhas, capacidade de generalização e processamento paralelo e distribuído. Por esta razão, possuem vantagem em aplicações que não podem ser adequadamente formuladas por um conjunto de regras ou equações, como, por exemplo, reconhecimento de padrões (GARDNER, 1990).

O neurônio artificial é a unidade de processamento de informação fundamental da operação das redes neurais. Na figura 3 é ilustrado o esquema de um neurônio artificial.

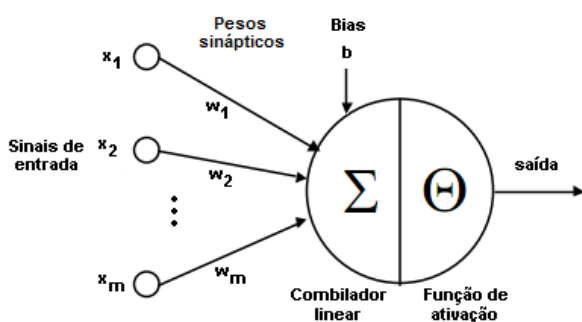


Figura 3 – Esquema de um neurônio artificial.

Um neurônio artificial pode ser modelado matematicamente com base nas equações 2 e 3, sendo esta o sinal de saída do neurônio e aquela a saída do combinador linear.

$$u_k = \sum_{j=1}^m w_{kj} x_j \quad (2)$$

$$y_k = \varphi(u_k + b_k) \quad (3)$$

As ANNs podem ter vários tipos de arquiteturas formadas por camadas que por sua vez estão formadas por neurônios. Do ponto de vista da arquitetura podem ser alimentada adiante (*feedforward*) ou recorrentes (*feedback*). Nas redes *feedforward*, a informação se desloca em um único sentido, isto é, da entrada para saída através das camadas. Já nas redes recorrentes não existe um sentido para o deslocamento da informação, podendo haver processos de realimentação. Não existem regras para a escolha do número de camadas em uma rede neural, isso geralmente depende da experiência do projetista, embora existam alguns poucos critérios (HINES, 1999).

As redes neurais com arquitetura *feedforward*, em conjunto com o algoritmo de aprendizagem de retropropagação do erro (*backpropagation*), são as mais

utilizadas em aplicações práticas (GARDNER, 1990; HINES, 1999). Entre estes tipos destaca-se a arquitetura *Perceptrons de múltiplas camadas*, pois apresenta uma função de ativação não-linear suave (*sigmóide*), aprendizado de tarefas complexas e habilidade de aprender por experiência através de treinamento (PARDO, 2004). O aprendizado deste tipo de rede ocorre de forma supervisionada, ou seja, por meio de pares de vetores de entradas com os respectivos pares desejados na saída da rede neural.

4 Desenvolvimento do Protótipo

Neste trabalho foram utilizados 05 (cinco) sensores de gás *Tagushi*, cujas referências são mostradas na tabela 1 com os respectivos gases aos quais são mais sensíveis. Para converter a mudança de condutividade destes sensores em sinais de tensão realizou-se a polarização elétrica através de um circuito divisor de tensão.

Tabela 1 – Sensores *Tagushi* utilizados no trabalho.

Sensores <i>Tagushi</i>	Alta Sensibilidade
TGS 813	Gases combustíveis
TGS 2600	Hidrogênio, monóxido de carbono
TGS 2602	Amônia e sulfeto de hidrogênio
TGS 2611	Metano, propano e butano.
TGS 2620	Solventes orgânicos

Na figura 4 é ilustrado o diagrama funcional simplificado do protótipo. A câmara de aquisição tem por função acondicionar as amostras a serem analisadas, para que estas possam liberar, sem a influência do ambiente externo, os gases voláteis que serão captados pelos sensores de gás. A limpeza da câmara é feita através de uma ventoinha que se encontra internamente. O controlador digital de sinais (dsPIC) é o responsável pelo processamento da informação tanto na etapa de coleta de dados das amostras quanto na etapa dos testes de reconhecimento.

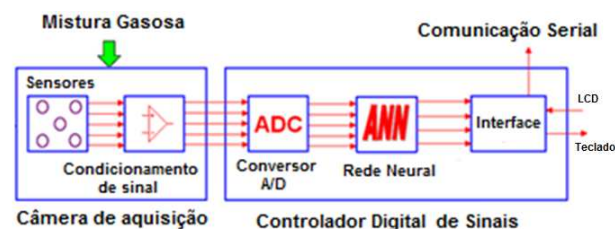


Figura 4 – Diagrama funcional simplificado do protótipo.

Para oferecer portabilidade ao sistema a parte eletrônica do projeto foi totalmente acoplada à câmara de aquisição, conforme mostrado na figura 5 (1). Para o armazenamento das informações obtidas dos sensores foi implementada uma interface gráfica para recepção dos dados através de comunicação serial, conforme exposto na figura 5 (2).

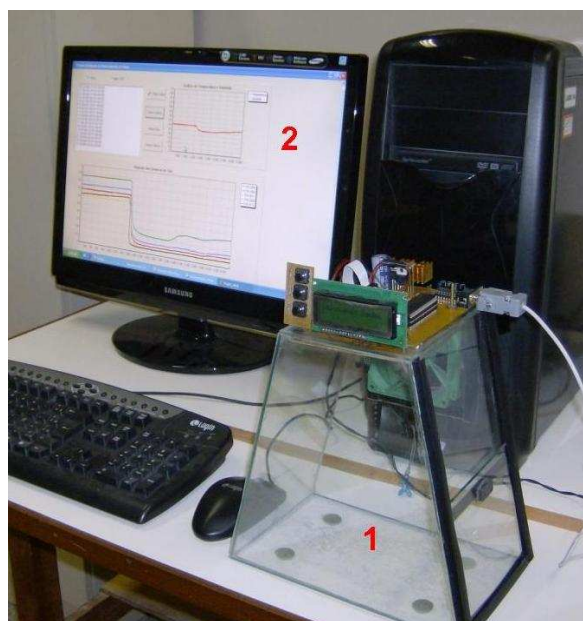
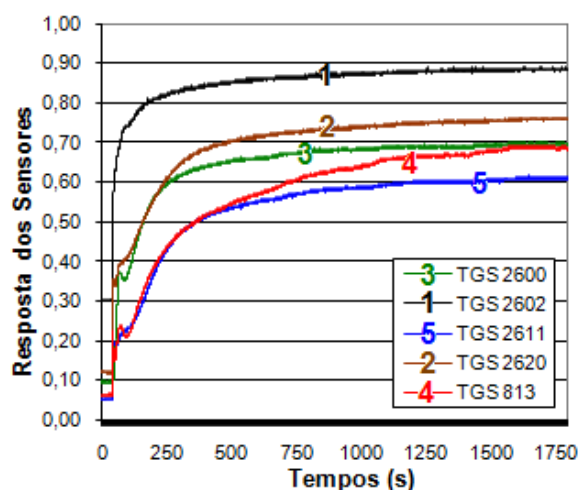


Figura 5 – (1) Protótipo do sistema de sensoriamento de gases; (2) Interface gráfica de recepção e armazenamento de dados.

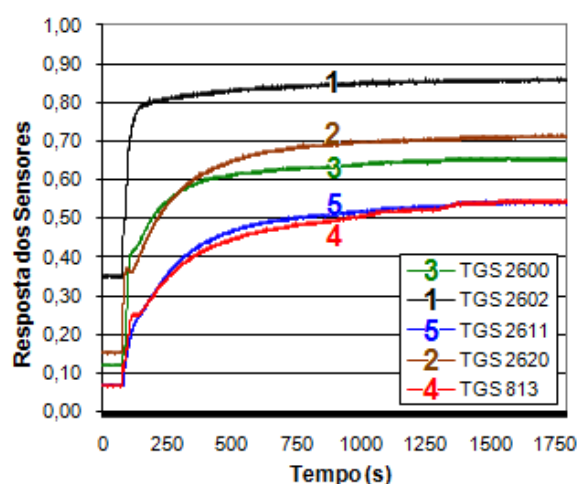
Para que a rede neural reconheça um determinado padrão é necessário que seja treinada a partir de uma base de dados. Para isso foi necessário planejar a coleta dos dados e fazer a análise destes para identificar os dados característicos de cada amostra, separando assim uma base de dados para o treinamento e outra para a verificação da rede neural.

A etapa de coleta de dados foi realizada com 40 ml de cada bebida alcoólica por um período de 30 minutos durante quatro dias e em horários distintos, para cada coleta foi utilizada uma nova amostra. Os resultados obtidos na coleta de dados indicaram que os padrões das amostras de bebidas analisadas distinguiram-se a partir de 900 segundos de análise (considerando somente à fase estacionária dos sensores de gás), conforme mostrado na figura 6, o que resultou na seleção dos dados a partir do tempo supracitado. Os dados da fase estacionária foram selecionados porque foi constatado que a fase transitente de resposta, fase inicial, era dependente de como a amostra era inserida na câmara, isto é, o tempo que a porta lateral da câmara ficou aberta, a velocidade de inserção da amostra, a posição da amostra dentro da câmara de aquisição entre outros aspectos, diferentemente da fase estacionária da resposta que sempre gerou padrões semelhantes. Nesta etapa foi selecionado um conjunto de 120 dados de cada amostra, sendo que 70% destes dados foram utilizados para realizar o treinamento e 30% para a realização de testes da rede neural artificial.

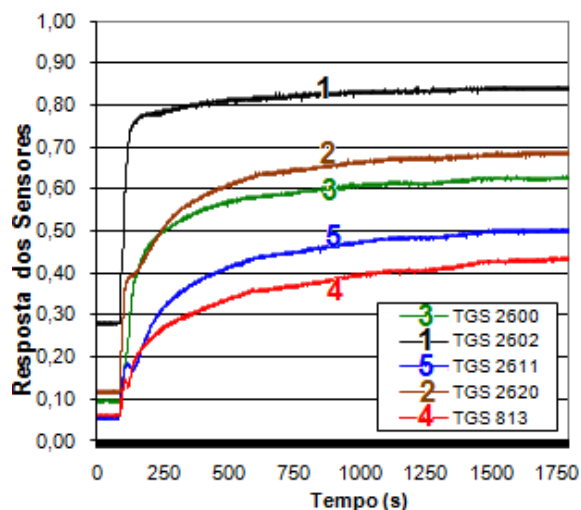
A rede neural foi implementada em linguagem C no compilador *DevC++*, tanto o algoritmo de treinamento quanto o algoritmo de testes. Com o treinamento e os testes avaliados corretamente, o código da rede neural assim como os valores dos pesos sinápticos foram introduzidos no código do dsPIC, sendo este também programado em linguagem C por meio do compilador MapLab C30, da *Microchip*.



(a) Resposta dos sensores de gás ao aguardente de cana



(b) Resposta dos sensores de gás ao vinho tinto 1



(c) Resposta dos sensores de gás ao vinho tinto 2

Figura 6 – Resposta dos sensores de gás as amostras utilizadas nos experimentos.

A rede neural utilizada foi do tipo *Perceptrons de múltiplas camadas*, conforme arquitetura ilustrada na figura 7. Cada círculo desta arquitetura equivale ao esquema do neurônio artificial apresentado na figura 3 e ao modelo matemático da equação 3. Esta rede foi

treinada com o algoritmo de retropropagação de erro, com parâmetro da taxa de aprendizado da rede neural igual a 0,7 e o valor do coeficiente de momento igual a 0,5. A condição de parada do treinamento foi o erro médio quadrático, cujo valor foi especificado em 0,01%.

A arquitetura da rede foi escolhida após a realização de diversos testes práticos com diferentes arquiteturas, sendo que a rede da figura 7 apresentou os melhores resultados na relação tempo de treinado e tempo de reconhecimento da amostra.

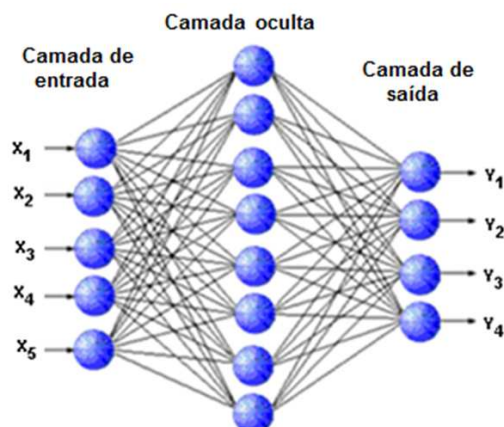


Figura 7 – Arquitetura de rede neural utilizada no trabalho.

Na etapa de reconhecimento, os dados obtidos dos sensores (TGS 2600, TGS 2602, TGS 2610, TGS2611 e TGS 813), após normalização (X_1 , X_2 , X_3 , X_4 , X_5), são inseridos na camada de entrada da rede neural, sendo que cada neurônio desta camada recebe os dados de um sensor diferente. Em seguida, os dados são processados pelos neurônios da camada oculta e por último pelos neurônios da camada de saída. Na fase de treinamento foram escolhidas as saídas desejadas da rede neural para os dados utilizados no treinamento, conforme exposto na tabela 2.

Tabela 2 – Saídas desejadas da rede neural artificial.

Amostra	Saída Desejada			
	Y ₁	Y ₂	Y ₃	Y ₄
Aguardente de cana (AG)	1	1	0	0
Vinho tinto 1 (V1)	0	1	1	0
Vinho tinto 2 (V2)	0	0	1	1
Sem amostra	0	0	0	1

O bloco *interface*, do diagrama da figura 4, verifica se a saída da rede é igual a alguma das saídas desejadas (com uma variação de 5%). Caso esta comparação seja verdadeira, será indicado no LCD do protótipo o nome da amostra identificada. Caso contrário será apresentado no display a mensagem “Amostra Desconhecida”.

5 Resultados e Discussão

Os testes de reconhecimento foram realizados com os três tipos de bebidas alcoólicas utilizados na etapa de coleta de dados (um aguardente de cana marca “pitu” e dois tipos de vinho tinto marcas “do frei” e “cortezano”), a escolha destas bebidas tomou como base a perspectiva de análise de tipos de amostra diferentes e tipos de amostras parecidas. Estes testes foram realizados em quatro dias diferentes, sendo dois testes por dia para cada uma das três amostras de bebidas, totalizando 24 testes de reconhecimento. O volume da bebida utilizado foi o mesmo da etapa de coleta de dados.

Os testes foram realizados com uma metodologia padrão, a qual foi obtida por meio de avaliações práticas. Basicamente, adotou-se a metodologia por testes contínuos, ou seja, termina-se um teste de reconhecimento e inicia-se outro. Cada teste teve a duração de 50 minutos, isto já considerando o tempo de limpeza da câmara (5 min), recuperação dos sensores de gás (30 min) e tempo de reconhecimento de amostras (até 15 min).

Os resultados obtidos nos testes de reconhecimento são apresentados na tabela 2, na qual é indicado para cada teste o nome da amostra que foi identificada. Verificou-se que houve sucesso no reconhecimento em todos os testes realizados com as amostras de bebidas alcoólicas.

Tabela 2 – Resultados obtidos nos testes de reconhecimento

Amostras	Teste	Dia 1	Dia 2	Dia 3	Dia 4
AG	1º	AG	AG	AG	AG
	2º	AG	AG	AG	AG
V1	1º	V1	V1	V1	V1
	2º	V1	V1	V1	V1
V2	1º	V2	V2	V2	V2
	2º	V2	V2	V2	V2

Legenda:

AG – Aguardente de cana

V1 – Vinho tinto 1 (marca “cortezano”)

V2 – Vinho tinto 2 (marca “do frei”)

A partir dos resultados obtidos nos testes de reconhecimento constatou-se que a metodologia adotada foi adequada para a identificação das três amostras de bebidas alcoólicas, pois não foi verificado nenhum erro (indicação de amostra desconhecida) ou falso positivo (indicação de outro tipo de amostra) nos testes realizados.

Em todos os testes o tempo para o reconhecimento das amostras foi de até 900 segundos, sendo que este foi estipulado na etapa de coleta de dados, pois foi considerado como o tempo necessário para a estabilização da resposta dos sensores de gás. Este tempo pode ser significativamente reduzido com algum método capaz de diminuir o tempo de estabilização dos sensores, como por exemplo, o aumento do volume da amostra ou a redução do volume da câmara de aquisição.

Nos testes realizados, assim como na etapa de coleta de dados, os valores da temperatura ambiente dentro da câmara estiveram na faixa de 27 a 31 °C, já para a umidade relativa do ar esta variação esteve na faixa de 36 a 40%. Estes resultados indicaram que a câmara de aquisição permitiu que os sensores de gás realizassem medições confiáveis, uma vez que a temperatura e umidade do ambiente interferem nas medições dos sensores. Estes resultados foram imprescindíveis para realizar a análise e o reconhecimento das amostras.

6 Conclusão

Este estudo inicial permitiu verificar as potencialidades da aplicação dos princípios do nariz eletrônico no desenvolvimento de sistemas portáteis e de múltiplas aplicações.

No contexto da aplicação utilizada, para validar o sistema ainda são necessários alguns estudos adicionais para aperfeiçoar o desempenho do sistema, principalmente incrementar o universo de bebidas a serem identificadas.

O sistema de reconhecimento foi projetado para identificar outros tipos de odores em diferentes aplicações, necessitando para isto ajustar os parâmetros livres da rede neural artificial, obtidos através do processo de treinamento.

Ressalta-se que para aplicações específicas deverá ser realizado um estudo mais aprofundado de aspectos como: a metodologia de coleta de dados, o volume ideal da câmara, o volume da amostra, distância da amostra aos sensores, necessidade de incrementar mais sensores e estudo de outras técnicas de reconhecimento de padrões.

É importante corroborar que com relação à proposta inicial os resultados obtidos com o desenvolvimento do sistema foram satisfatórios, demonstrando a viabilidade da aplicação de sensores de gás de óxido de estanho associados com redes neurais artificiais para a identificação de substâncias com odores característicos, como no campo da saúde, meio ambiente, indústria alimentícia, indústria química e petroquímica, entre outras áreas.

Agradecimentos

Os autores deste trabalho agradecem a Universidade Federal de Sergipe pelo apoio financeiro através do Programa Institucional de Iniciação em Desenvolvimento Tecnológico e Inovação (PIBITI).

Referências Bibliográficas

- Barsan, N.; Koziej, D.; Weimar, U. (2007) Metal oxide-based gas sensor research: How to? Sensors and Actuators B, vol.121, p.18-35.
- Demarne, V.; Grisel, A.; Sanjinks, R.; Rosenfeld, D. (1992); Lévy, F. Electrical transport properties of thin polycrystalline SnO₂ film sensors. Sensors and Actuators B, vol.7, p.704-708.
- Figaro Engineering Inc. (2005), general information for TGS sensors, Osaka, Japão, Disponível em <http://www.figarosensor.com/products/common%281104%29.pdf>. Acesso em 09/11/2008.
- Gardner, J.W.; Hines, E.L.; Wilkinson, M. (1990) The application of artificial neural networks in an electronic nose, Meas. Sci. Technol., vol.1, p.446-451.
- Haykin, Simon (2001), Redes Neurais: princípios e prática, 2ª edição, tradução: Paulo Martins Engel, Editora: Bookman, Porto Alegre, Cap. 1, 2, 3 e 4.
- Hines, E.L.; Llobet, E.; Gardner, J.W. (1999) Electronic noses: a review of signal processing techniques. IEEE Proc. Circuits Devices Syst., vol.146, n.6.
- Lozano, J.; Santos, J.P.; Sayago, I.; Gutierrez, J.; Horrillo, M.C. (2004) Identification of typical wine aromas by means of an electronic nose. IEEE Sensors Journal, vol. 1, p.345-348.
- Nykanen, L; Nykanen, I. Distilled Beverages. In: MAARSE, H (1991). Volatile compounds in foods and beverages. New York: Marcel Dekker, Cap.15, p.547-580.
- Pardo, Matteo; Sberveglieri, Giorgio (2004) Remarks on the Use of Multilayer Perceptrons for the Analysis of Chemical Sensor Array Data. IEEE Sensors Journal, vol.4, n.3.
- Persaud, K.C.; Dodd, G. (1982) Analysis of discrimination mechanisms in the mammalian olfactory system using a model nose. Nature, vol.299, p.352-355.
- Röck, Frank; Barsan, Nicolae; Weimar, Udo (2008) Electronic Nose: Current Status and Future Trends. Chem. Rev., vol.108, p.705-725.
- Stetter, Joseph R.; Penrose, William R. (2002) Understanding Chemical Sensors and Chemical Sensor Arrays (Electronic Noses): Past, Present, and Future. Wiley InterScience, Journals Sensors, vol.10, p.189-229.
- Strike, D.J.; Meijerink, M.G.H.; Koudelka-Hep, M. (1999) Electronic noses - a mini-review. Fresenius J. Anal. Chem., vol.364, p.499-505.
- Wilson, Alphus D.; Baietto, (2009) Manuela Applications and Advances in Electronic-Nose Technologies. Journals Sensors, vol.9, p.5099-5148.